

高速振動平板間における高分子溶液の流れのマルチスケールシミュレーション

Multiscale simulation for polymer melt flow in rapidly oscillating plates

○安田修悟, 京大・工・化学工学, 京都市西京区京都大学桂, E-mail: yasuda@cheme.kyoto-u.ac.jp

山本量一, 京大・工・化学工学, 京都市西京区京都大学桂, E-mail: ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp

Shugo YASUDA, Department of Chemical Engineering, Kyoto University, Kyoto 615-8510

Ryoichi YAMAMOTO, Department of Chemical Engineering, Kyoto University, Kyoto 615-8510

The behavior of supercooled polymer melt composed of short chains with ten beads between rapidly oscillating plates is simulated by using a hybrid simulation of molecular dynamics and computational fluid dynamics. The flow profiles of polymer melt near an oscillating plate are quite different from those of Newtonian fluid. The viscous boundary layer of the melt is much thinner than that of the Newtonian fluid due to the shear thinning of the melt. Three different rheological regimes, i.e., the viscous fluid, viscoelastic liquid, and viscoelastic solid regimes, form over the oscillating plate according to the local Deborah numbers. The melt behaves as a viscous fluid when $\omega\tau^R \lesssim 1$, and the crossover between the liquid-like and solid-like regime takes place around $\omega\tau^\alpha \simeq 1$ (where ω is the angular frequency of the plate and τ^R and τ^α are Rouse and α relaxation time, respectively).

本研究では高速に振動する平板間での高分子溶液の振舞をマルチスケールシミュレーションによって解析した。Fig. 1 に本研究でシミュレーションを行った系の略図を示す。平板間の距離 $2H$ は高分子を構成する一つの原子のサイズ σ の数千倍程度。具体的には、 $2H=1600\sigma, 3200\sigma$ について計算を行った。高分子溶液の巨視的な流れは、連続体モデルの運動量保存式によって計算される。ここで、各計算点での x 方向の流速 v_x はその点での局所的なせん断応力 σ_{xy} の y 軸方向の勾配によって変化する。通常のニュートン流体では、応力と流速の空間勾配の間に比例関係、 $\sigma_{xy} = \mu \partial v_x / \partial y$, があることが知られているので、その比例定数、即ち粘性係数 μ さえあらかじめ決めておけば、各点で求めた流速から各点での応力を求め、その瞬間の流速変化を計算することができる。しかし、高分子溶液にはそのような単純な比例関係は存在しない。ある時刻での各計算点の応力は同じ時刻におけるその点での巨視的な流速や変位だけでは表すことができず、その流体要素が経験した過去の変形速度の履歴によって変化する原子・分子レベルでの高分子の配置、形状に依存する。即ち、 $\sigma_{xy}(t) = F[\dot{\gamma}(t')]$, $t' \leq t$ 。ここで、 $\dot{\gamma}$ はひずみ速度、 $F[\dot{\gamma}]$ は $\dot{\gamma}$ の汎関数を表す。

我々のマルチスケールモデリングでは、各計算点での分子レベルでの高分子の運動を計算するための小さなセルを各計算点に貼り付けておき、そこで局所的な流速場と過去の履歴に基づく分子レベルでの情報から分子動力学シミュレーションを行い応力を求める。この方法を用いることで、高分子溶液に特徴的な粘弾性効果や履歴効果を正確にシミュレーションすることができる。(1,2)

Fig. 2 に振動平板上での高分子溶液の速度分布とナビエ・ストークス方程式によって計算された通常の粘性流体（ニュートン流体）の比較を示す。両者を比較すると、振動板からの位置（ y -軸方向の距離）による流速 v_x （ x -軸方向の流速）に明らかな違いが分かる。すなわち、通常の粘性流体溶液と異なり高分子溶液では振動板から遠ざかるに従いより急激に流速が低下することが分かる。これは高分子溶液では局所的な力学特性が局所的な流速場によって大きく変わることによる。高分子溶液の粘性は、速度勾配が大きくなると小さくなる。（シアニング）このため、平板近傍の激しく動いている速度勾配の大きな領域では粘性が小さくなり、平板から加えられる運動量が内部まで伝わらないのである。

本研究では、高分子溶液の局所的な粘弾性特性も調べた。その結果、高速に振動する平板間では高分子溶液は3つの異なる力学特性を持つ領域が形成されることが分かった。これについては講演時に発表する。

参考文献

- (1) S. Yasuda and R. Yamamoto. EPL **86**, 18002 (2009).
- (2) S. Yasuda and R. Yamamoto. Phys. Fluids **20**, 113101 (2008).

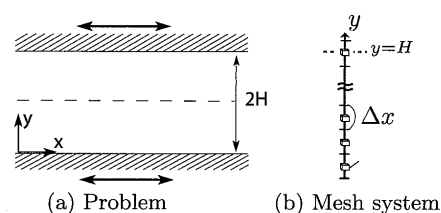


Fig. 1 シミュレーションした系の概略図。上下平板はそれぞれ平行に位相が π だけずれて振動する。巨視的な量は x -軸方向には一様であるとして、1次元の運動量保存式で計算される。各計算点で必要とされる局所応力は各計算メッシュ間に貼り付けられた3次元のMDセルでその局所的な流れ場を基に計算される。

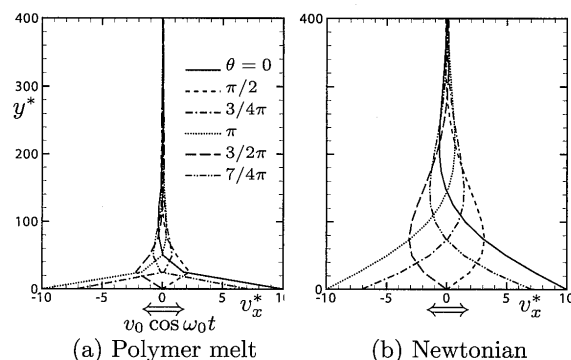


Fig. 2 高分子溶液 (a) とニュートン流体 (b) の流速分布の比較。ニュートン流体の粘性係数には高分子溶液の線形領域での運動粘性係数を用いた。各線はそれぞれ異なる時間での速度分布を表す。図の縦軸は下の振動平板からの距離を表す。